

BAB I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi merupakan salah satu masalah serius dalam sektor industri karena menyebabkan kerugian di setiap tahunnya. Salah satu kerusakan karena korosi yaitu banyaknya korban jiwa dan kerugian harta benda yang sangat besar. Oleh karena itu banyak peneliti yang mengembangkan metode pencegahan korosi^{1,2}. Ada berbagai metode yang dapat dilakukan untuk melindungi baja dari korosi seperti *elektroplating*, perlindungan katodik atau anodik dan penambahan inhibitor korosi^{3,4}. Penambahan inhibitor korosi adalah salah satu metode yang efektif, efisien dan ekonomis untuk menghambat laju korosi^{3,5,6}.

Inhibitor korosi adalah senyawa yang ditambahkan dalam jumlah kecil yang dapat mengurangi tingkat korosi dalam media agresif secara efisien³. Inhibitor dibagi menjadi dua jenis, yaitu inhibitor organik dan inhibitor anorganik⁷. Sebagian besar inhibitor dapat efektif digunakan apabila mengandung heteroatom seperti O, N, S, ikatan π , pasangan elektron bebas dan ikatan rangkap dalam molekulnya yang akan teradsorpsi pada permukaan logam⁸.

Kemampuan suatu senyawa sebagai inhibitor korosi dapat diuji melalui eksperimen maupun komputasi. Penelitian secara eksperimen berguna dalam menjelaskan mekanisme inhibisi korosi, namun cara ini membutuhkan biaya yang mahal dan waktu yang lama untuk memperoleh hasil yang dibutuhkan. Oleh karena itu, dengan adanya kemajuan *hardware* dan *software* saat ini, membuka peluang untuk penggunaan kimia teori dalam penelitian inhibisi korosi. Perhitungan kimia komputasi dapat digunakan untuk memprediksi kemampuan suatu senyawa sebelum dilakukan penelitian di laboratorium⁸. Beberapa penelitian yang telah dilakukan seperti studi komputasi inhibisi korosi untuk senyawa turunan 1H-Imidazo [4,5-F] [1,10] phenanthroline⁸, studi komputasi inhibisi korosi dari senyawa (*e*)-3-(2-*p*-tolylidiazonyl)-1-nitrosophthalen-2-ol⁹, dan studi komputasi potensi inhibisi korosi senyawa 4-methyl-4H-1,2,4-Triazole-3-Thiol dan 2-Mercaptonicotinic Acid¹⁰. Hal ini memperkuat fakta bahwa perhitungan kimia kuantum sangat penting dalam penentuan inhibisi korosi¹¹.

Density Functional Theory (DFT) adalah salah satu metode kimia komputasi yang populer digunakan dalam perhitungan parameter kimia kuantum. Metode ini sangat penting dalam perhitungan kimia kuantum karena dapat memberikan

parameter dasar yang akurat untuk suatu molekul¹². Metode ini dapat digunakan untuk mengilustrasikan pentingnya struktur dari suatu senyawa dan efisiensi adsorpsi inhibitor pada permukaan logam^{11,13}.

Senyawa α -D-glukopiranosida, 4-O- α -D-galaktopiranosil (G1) merupakan salah satu senyawa yang dapat diisolasi dari daun ceremai (*Phyllanthus acidus* L. Skeels) dengan menggunakan pelarut metanol¹⁴. Senyawa ini memiliki pasangan elektron bebas dalam struktur molekulnya. Dari penelusuran literatur, senyawa G1 belum pernah diteliti sebagai inhibitor korosi secara eksperimen maupun komputasi, oleh karena itu untuk memprediksi kemampuan dari senyawa G1 dilakukanlah penelitian secara komputasi dengan menggunakan metode DFT basis set B3LYP/6-31G.

Parameter yang diperoleh dari hasil optimasi yaitu energi HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*), energi LUMO (*Lowest Uncoppied Molecular Orbital*) dan energi total (E_{tot}). Dari nilai E_{HOMO} dan E_{LUMO} yang diperoleh kemudian dihitung nilai energi gap (ΔE), potensial ionisasi (I), afinitas elektron (A), elektronegativitas (χ), *hardness* (η), *softness* (σ), dan transfer elektron (ΔN)¹⁵. Kemudian energi total digunakan untuk menghitung nilai energi interaksi (E_{int}) dan energi ikatan ($\Delta E_{binding}$)¹⁶. Parameter diatas digunakan dalam penentuan kemampuan inhibisi korosi karena dari parameter tersebut dapat ditentukan kereaktifan suatu senyawa. Parameter lain yang dapat diperoleh dari hasil optimasi yaitu momen dipol, namun parameter ini sering menjadi perdebatan karena tidak dapat memberikan penjelasan yang baik tentang kemampuan suatu senyawa sebagai inhibisi korosi¹⁷.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas, maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah :

1. Apakah kemampuan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya dapat ditentukan dengan metode DFT?
2. Apakah ada hubungan parameter kimia kuantum dengan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya?
3. Apakah penambahan substituen berpengaruh terhadap kemampuan inhibisi korosi?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Untuk menentukan kemampuan inhibisi senyawa G1 dan turunannya.
2. Untuk menentukan hubungan antara parameter kimia kuantum dengan kemampuan inhibisi korosi senyawa G1 dan turunannya.
3. Untuk menentukan pengaruh penambahan substituen pada kemampuan inhibisi

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah memberikan informasi tentang struktur senyawa G1 yang efisien sebagai inhibitor korosi pada besi dengan menggunakan metode DFT. Sehingga nantinya bisa disintesis dan digunakan sebagai inhibitor korosi yang efisien.

